

УДК 539.3

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРЫ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ

П.В. Трусов, В.Н. Ашихмин, П.С. Волегов, А.И. Швейкин

Аннотация

Для описания процессов глубокого пластического деформирования поликристаллических материалов, сопровождающихся эволюцией структуры, предлагается двухуровневая (макро- и мезоуровни) модель с применением конститутивных соотношений, основанных на введении внутренних переменных. В модели поликристаллического агрегата (мезоуровня) учитываются внутризеренное дислокационное скольжение с учетом различных механизмов упрочнения и повороты кристаллической решетки зерен за счет несовместности движения дислокаций в соседних зернах. Приводятся и обсуждаются результаты решения задач экструзии цилиндрической заготовки из поликристаллической меди.

Ключевые слова: анизотропия свойств, внутренние переменные, конститутивные соотношения, физические теории пластичности, текстура, упрочнение, двухуровневая модель.

1. Модели материалов с внутренними переменными

Свойства поликристаллических материалов существенным образом определяются состоянием внутренней структуры; в частности, неравномерная функция распределения ориентаций решеток зерен в представительном объеме (текстура) порождает анизотропию упругих и пластических свойств материала, определяя эксплуатационные свойства изделия. Поэтому в настоящее время одной из актуальных проблем механики деформируемого твердого тела является моделирование эволюции структуры поликристаллов при деформировании, в первую очередь – в процессах обработки металлов давлением.

Имеются по крайней мере две возможности учета эволюции мезо- и микро-структуры: неявным или явным способом [1]. В первом случае в структуру определяющих соотношений (ОС) вводятся достаточно сложные операторы над историей макронагружения (макродеформации) без использования соответствующих параметров, описывающих эволюцию собственно мезо- и микроструктуры. Как правило, при этом трудно выявить и обосновать физический смысл и механизмы деформирования, описываемые различными операторами модели материала. В последние годы при построении моделей деформирования поликристаллов, описывающих эволюцию мезо- и микроструктуры, все большее признание находит подход, основанный на явном введении в структуру определяющих соотношений параметров, отражающих состояние и эволюцию мезо- и микроструктуры, и формулировке эволюционных (кинетических) уравнений для этих параметров, называемых внутренними переменными и являющихся носителями информации об истории воздействий [1–3]. Часть внутренних переменных непосредственно входит в структуру определяющих соотношений данного масштабного уровня, такие переменные можно назвать «явными» (explicit) внутренними переменными, вторая группа внутренних переменных – «скрытые (неявные)» (implicit) переменные,

в большинстве случаев относящиеся к более глубоким масштабным уровням, используется для замыкания системы уравнений.

В контексте данного подхода в настоящее время упругопластическое деформирование представительного объема поликристалла описывают с использованием прямых ([4, 5] и др.) или статистических ([6, 7] и др.) моделей.

Прямые модели, предполагающие решение краевых задач на уровне зерен (мезоуровне) с использованием, как правило, метода конечных элементов, позволяют более точно находить распределение напряжений и деформаций в области, учитывать ближнее и дальнее взаимодействие зерен. Однако применение данного подхода ввиду больших вычислительных затрат и сложности генерации расчетной области, соответствующей реальным объектам, обычно ограничено модельным двумерным случаем.

Статистические модели в вычислительном плане более эффективны и активно применяются для моделирования упругопластического деформирования реальных материалов. В рамках этих моделей поликристалл рассматривается как совокупность различно ориентированных зерен-монокристаллов, воздействие на каждое зерно реализуется с использованием гипотезы Фойгта (для большинства моделей) или Рейсса, отклик представительного объема определяется тем или иным осреднением откликов отдельных зерен. Стоит отметить, что в большинстве существующих работ данного направления нет учета взаимодействия соседних зерен (кроме опосредованного - за счет гипотезы Фойгта или Рейсса).

В настоящей работе предлагается двухуровневая модель неупругого деформирования поликристаллов, описывающая эволюцию структуры (текстурирование), учитывая при этом взаимодействие соседних зерен за счет несовместности скольжения дислокаций в них и физические механизмы внутризеренного упрочнения.

2. Структура двухуровневой модели неупругого деформирования поликристалла

При использовании многоуровневого подхода исследуемая область на макроуровне (макротело) заменяется кусочно-однородными элементами, объем каждого из которых не должен быть меньше представительного объема макроуровня [8]. Каждой такой подобласти в любой момент нагружения можно поставить в соответствие аналогичную по форме и размерам область, заполненную однородным материалом (то есть не имеющим внутренней структуры) с соответствующими эффективными свойствами и однородным *напряженно-деформированным состоянием*. Подобную подобласть для краткости будем называть *макроточкой*. Так как число макроточек в рассматриваемом объеме конечно, то отличить одну макроточку от другой можно по ее номеру X или по ее лагранжевым координатам (рис. 1).

Для построения модели мезоуровня зернам можно поставить в соответствие *мезоточки*, заполненные модельным однородным материалом мезоуровня. В качестве материала мезоточки можно принять идеальный кристалл (например, с кубической гранецентрированной (ГЦК) решеткой), обладающий соответствующими анизотропными упругими свойствами и набором систем скольжения. Параметрами процесса на макроуровне являются предписанные условия нагружения (краевые условия), которые и определяют эволюцию макронапряжений $\Sigma(t, X)$ и макродеформаций $\mathbf{E}(t, X)$ и их скоростей. Определяющие соотношения макроуровня представляют собой (анизотропный) закон Гука в скоростной релаксационной форме

$$\dot{\Sigma}^r = \mathbf{C} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^p), \quad (1)$$

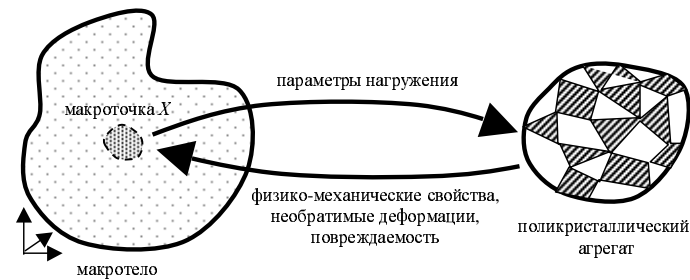


Рис. 1. Схема взаимодействия макро- и мезоуровней

где \mathbf{C} – тензор модулей упругости, \mathbf{D} , \mathbf{D}^p – тензор деформации скорости и его пластическая составляющая, индекс “ r ” означает коротационную производную. К настоящему времени отсутствует однозначное решение вопроса о выделении квазитвердого движения макроточки и связанного с ним вопроса выбора индифферентной производной; некоторые возможные варианты такого выбора рассмотрены в [9].

Пластическая составляющая деформации скорости \mathbf{D}^p и анизотропные упругие свойства \mathbf{C} в каждый момент деформирования зависят от микроструктуры (а через нее – от истории нагружения), являясь явными внутренними переменными модели макроуровня [1]. При одноуровневом подходе для данных параметров необходимо вводить дополнительные гипотезы и феноменологические эволюционные уравнения. Провести надежное обоснование этих гипотез и уравнений весьма сложно. При двухуровневом подходе каждой макроточке ставится в соответствие структурная модель, состоящая из мезоточек (в рассматриваемом случае – модель поликристаллического агрегата), и вводятся правила взаимодействия макро- и мезоуровней. Параметры мезоточек (ориентаций кристаллографической системы координат (КСК), сопротивление сдвигу по системам скольжения (СС), скорости и накопленные сдвиги по СС) выступают в качестве неявных внутренних переменных [1] макроуровня.

В силу случайного распределения начальных ориентаций КСК мезоточек набор значений неявных внутренних переменных, фигурирующих в модели поликристаллического агрегата, можно считать выборкой случайных чисел. Тогда правила взаимодействия макро- и мезоуровней сводятся к оценке математических ожиданий соответствующего параметра по имеющейся выборке. Например, скорость пластических деформаций $\mathbf{D}^p(t, X)$ макроточки X вычисляется (ориентационным) осреднением выборки скоростей пластических деформаций \mathbf{d}^p для момента времени t по всем мезоточкам данной макроточки. При этом предполагается одинаковость хода времени на макро- и мезоуровнях.

Для определения тензора упругих свойств \mathbf{C} макроточки можно использовать выборку $\Phi(t, X)$ ориентаций КСК мезоточек поликристаллического агрегата. Преобразуя компоненты тензора упругих свойств мезоточек из КСК в лабораторную систему координат (ЛСК), получаем выборку упругих свойств в ЛСК. Затем по одной из моделей (Фойгта, Рейсса или Хашина – Штрикмана) находят эффективные упругие свойства макроточки в ЛСК, которые без дополнительных преобразований, связанных с поворотами, можно использовать в макрозадаче. По выборке $\Phi(t, X)$ ориентаций КСК мезоточек поликристаллического агрегата можно построить функцию распределения ориентаций (ФРО), являющейся функцией плотности распределения случайной величины.

3. Модель неупругого деформирования зерна

3.1. Модель внутризеренного пластического деформирования за счет скольжения краевых дислокаций. Основным механизмом пластического деформирования металлов является внутризеренное скольжение краевых дислокаций. При этом плоскости залегания и ориентация векторов Бюргерса, вдоль которых осуществляется трансляционное движение (скольжение) краевых дислокаций, известны, ими являются наиболее плотно упакованные плоскости и направления. В ГЦК-металлах скольжение краевых дислокаций осуществляется в плоскостях системы $[111]$ по направлениям $\langle 110 \rangle$; число таких возможных систем скольжения равно 12. Для описания каждой системы скольжения вводится ориентационный тензор $\mathbf{M}^s = (\mathbf{b}^s \mathbf{n}^s + \mathbf{n}^s \mathbf{b}^s)/2$, $s = 1, \dots, 12$, где \mathbf{n}^s , \mathbf{b}^s – единичные векторы нормали и направления скольжения (вдоль направления вектора Бюргерса) для s -й системы скольжения.

В статистических физических теориях пластичности не рассматривается движение отдельных дислокаций, их распределение полагается однородным по зерну (монокристаллу), что дает возможность рассмотрения неупругой составляющей тензора деформации скорости \mathbf{d}^p в виде:

$$\mathbf{d}^p = \sum_{k=1}^K \mathbf{M}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)}, \quad (2)$$

где $\dot{\gamma}^{(k)}$ – скорость сдвига по k -й системе скольжения.

В качестве критерия активности сдвига (скольжения дислокаций) по системе скольжения используется закон Шмида

$$\tau_s \equiv \mathbf{M}^s : \boldsymbol{\sigma} = \tau_s^c, \quad (3)$$

где τ_s – действующее в системе скольжения s касательное напряжение, $\boldsymbol{\sigma}$ – однородный по рассматриваемому зерну тензор напряжений Коши, τ_s^c – критическое напряжение сдвига в той же системе скольжения, зависящее, вообще говоря, от многих факторов и переменных; более подробно о законах упрочения см. п. 3.2.

В настоящей работе в качестве базовой модели зерна (монокристалла) предлагается использовать физическую теорию Линя [10]. В этой модели элементом статистической выборки, как и в наиболее популярных для описания упругопластического деформирования моделях Тейлора–Бишоп–Хилла [7, 11], является зерно, но, в отличие от последних, учитываются упругие деформации и анизотропия упругих свойств материала зерна (отметим, что первоначально модель была предложена для упруго-изотропных зерен). На мезоуровне (уровне зерна) в качестве определяющего соотношения выступает закон Гука в скоростной форме, при этом учитывается анизотропия кристаллической решетки:

$$\boldsymbol{\sigma}^r = \mathbf{c} : \mathbf{d}^e = \mathbf{c} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^p), \quad \dot{\boldsymbol{\sigma}}^r = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}, \quad (4)$$

где \mathbf{c} – тензор четвертого ранга упругих свойств, его компоненты в кристаллографической системе координат известны, для определения компонент \mathbf{c} в других системах координат используются стандартные преобразования, \mathbf{d} , \mathbf{d}^e , \mathbf{d}^p – тензор деформации скорости, его упругая и пластическая составляющие.

В соотношении (4) учитывается геометрическая нелинейность (первоначально модель Линя была сформулирована для случая малых деформаций): квазитвердое движение [9] связывается с решеткой – в коротационной производной тензора напряжений Коши $\boldsymbol{\sigma}$ фигурирует тензор спина $\boldsymbol{\Omega}$, характеризующий скорость вращения кристаллической решетки (модели поворота решетки рассматриваются

ниже). Таким образом, напряжения характеризуют именно упругие связи в зерне, связанные с изменением расстояний между соседними атомами.

Основная идея модели Линя заключается в точном обеспечении движения изображающей точки в пространстве напряжений внутри или по поверхности многогранника текучести с точным определением активных в текущий момент систем скольжения.

Для известного (определенного алгоритмически) набора активных систем скольжения в текущий момент времени при наличии поворотов система уравнений в скоростях имеет вид

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^s) = f'_s(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}) \sum_{p=1}^{K_a} \dot{\gamma}^p, & i = 1, \dots, K, \quad s = 1, \dots, K_a, \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{c} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^p) + \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}, \\ \mathbf{d}^p = \sum_{p=1}^{K_a} \mathbf{M}^p \dot{\gamma}^p, \\ \mathbf{d} = \mathbf{D}, \\ \text{соотношения для определения } \boldsymbol{\Omega}, \end{cases} \quad (5)$$

где $f_s(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)})$ – функция упрочнения (критическое напряжение сдвига по системам скольжения), K_a – число активных СС, K – общее число СС.

Уравнения (5)₁ – требование равенства скорости касательного напряжения на активной системе скольжения скорости критического напряжения для этой системы скольжения, (5)₂ – закон Гука в скоростной релаксационной форме с учетом геометрической нелинейности (1), (5)₃ – кинематическое соотношение (2), (5)₄ – гипотеза Фойгта (в модели Линя используется гипотеза Фойгта, тензор деформации скорости макроуровня \mathbf{D} определяется из решения краевой задачи), (5)₅ – соотношения той или иной модели поворота. Явными внутренними переменными мезоуровня являются скорости пластических деформаций и спин решетки. Скорости пластических сдвигов и критические напряжения сдвига для систем скольжения можно отнести к неявным внутренним переменным мезоуровня.

3.2. Законы упрочнения. Зернограничное упрочнение. Если говорить об описании эволюции микро- и мезоструктуры материала в процессах глубокой пластической деформации, то естественным образом встает вопрос об описании упрочнения, то есть о законах изменения критических касательных напряжений на каждой из систем скольжения каждого из зерен поликристалла в процессе неупругого деформирования. Очевидно, что именно в этих специфических соотношениях должны быть заложены механизмы эволюции дефектной структуры материала (в первую очередь дислокационной структуры), определяющие его поведение при пластической деформации.

Вообще говоря, физические причины, приводящие к упрочнению, весьма разнообразны: в первую очередь упрочнение связывают с взаимодействием дислокаций друг с другом, со скоплениями дислокаций и другими дислокационными субструктурами [12]. Важным аспектом упрочнения является взаимодействие полных и расщепленных дислокаций, а также последних между собой, приводящее к образованию так называемых сидячих дислокаций (или, иначе, барьеров Ломе-ра–Коттрелла), полностью перекрывающих плоскости залегания для движения других дислокаций. Кроме того, существенное влияние на упрочнение оказывает наличие границ зерен в поликристаллическом агрегате, что подтверждается экспериментальными исследованиями [13]. Границы зерен играют по крайней мере

двойную роль. Они представляют собой специфические области дефектной структуры с характерной толщиной от сотых до десятых долей мкм (в зависимости от типа границы) и плотностью дислокаций в 1.2–1.5 раз выше, чем в зернах. В связи с этим границы зерен могут выступать как специфический механизм неупругого деформирования (так называемого зернограницного скольжения), так и как генераторы дислокаций, и как «устройства», реализующие аккомодационные механизмы.

В рамках настоящего исследования будем разделять упрочнение на «неориентированное» и «ориентированное». Первое описывает упрочнение независимо от направления деформирования (образование пересечений дислокаций, жгутов, кос, барьеров Ломера–Коттрелла); такое упрочнение приводит к увеличению критического напряжения сдвига сразу на многих системах скольжения (или даже сразу на всех). Второе связано с накоплением упругой энергии на «поджатых дислокациях» (на различных барьерах), эта энергия может (полностью или частично) высвободиться при смене направления деформирования. Запасаемую на микродефектах энергию, в свою очередь, можно разделить на два типа: невысвобождаемая на микро- и мезодеформациях (в дальнейшем именно эта энергия должна вести к образованию микротрещин) и высвобождаемая. На данном этапе в законы упрочнения входит вторая составляющая; доля «высвобождаемости» зависит от сложности нагружения; например, если имеется плоское скопление дислокаций, поджатых к барьеру, то накопленная упругая энергия практически полностью будет освобождаться при реверсивном нагружении; если же это накопление будет происходить на фоне множественного скольжения с образованием жгутов, кос, то значительная часть энергии остается в материале и при реверсивном нагружении.

В работе [1] дается достаточно подробное описание методики определения внутренних переменных при установлении общего вида дополнительных слагаемых в закон упрочнения, описывающих дополнительное упрочнение, возникающие при реакциях на расщепленных дислокациях, а также разупрочнение в результате аннигиляции дислокаций при реверсивном нагружении. Здесь остановимся на еще одном интересном эффекте – зернограницном упрочнении.

Итак, общий вид закона упрочнения для каждой из систем скольжения в скоростной форме запишем в виде:

$$\dot{\tau}_s^c = f_s(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}) + f_s^{\text{зг}}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \delta_1^{(i)}, \delta_2^{(i)}, \dots, \delta_m^{(i)}), \quad s, k = 1, 2, \dots, 24, \quad (6)$$

где $f_s(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)})$ определяет «классическое» соотношение для упрочнения, $f_s^{\text{зг}}$ – дополнительное слагаемое, описывающее зернограницное упрочнение, $\delta_1^{(i)}, \delta_2^{(i)}, \dots, \delta_m^{(i)}$ – наборы внутренних переменных, характеризующих соответствующие механизмы.

В качестве «классического» соотношения используем обычный степенной закон в виде:

$$f_s(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}) = \psi E \left(\sum_{i=1}^{24} a_i^s (\gamma^{(i)})^{\psi-1} \dot{\gamma}^{(i)} \right),$$

$$s = 1, 2, \dots, 24, \quad \psi > 1, \quad \gamma^{(i)} \geq 0, \quad \tau_s^c(0) = \tau_{s0}^c,$$

где τ_{s0}^c – начальный предел текучести в s -й системе скольжения, E – модуль Юнга, a_i^s – так называемые модули упрочнения, разделяемые на коэффициенты деформационного $a_i^{(i)}$ и латентного упрочнения $a_i^{(k)}$, $k \neq i$.

Нужно отметить, что к настоящему моменту в литературе нет единой точки зрения относительно механизма взаимодействия дислокаций с границей. Открытым также остается вопрос, проникает ли дислокация через границу зерна. Здесь

принимается модель пластического деформирования поликристалла, согласно которой дислокация, приближаясь к границе, поглощается ею, тогда как сама граница порождает дислокации, обеспечивающие пластический сдвиг в соседнем зерне (в направлении деформирования) [14]. Совокупность актов поглощения дислокации границей и испускания границей дислокации в соседнее зерно будем условно трактовать как прохождение дислокации через границу, сопровождающееся сменой направления вектора Бюргерса дислокации и появлением в границе дислокации ориентационного несоответствия (ДОН).

«Дополнительное» зернограничное упрочнение должно зависеть от скорости сдвига γ^s по данной системе скольжения (от интенсивности поступления дислокаций в окрестность границы и дислокационных реакций в границе). Указанное слагаемое должно зависеть от накопленного сдвига по данной системе скольжения (плотности ДОН в границе [15]). Дислокации данного зерна могут реагировать с различными участками границы, образуемыми различными парами зерен; при построении соответствующего соотношения важно учитывать долю из общего числа реагирующих дислокаций, приходящуюся на конкретную пару зерен, поэтому введем вспомогательную величину, равную отношению площади границы зерна, которую пересекают плоскости данной системы скольжения, к общей площади границы рассматриваемого зерна.

Необходимо также ввести некоторую меру ξ взаимной разориентации данной системы скольжения, границы и системы скольжения соседнего зерна, в которую проходят дислокации из данной системы. Эта мера должна характеризовать ориентацию дислокационных структур, в первую очередь, дислокаций ориентационного несоответствия, появляющихся в границе в результате продолжающейся пластической деформации в зерне, и определять их влияние на дальнейшее движение дислокаций в двух соседних зернах, образующих границу. Таким образом, определив внутренние переменные, можно записать искомое слагаемое в следующем общем виде:

$$f_s^{\text{згу}}(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}, \xi) = \eta \gamma^s \dot{\gamma}^s \sum_{k=1}^P \frac{S_k}{S_0} \xi_{ik}, \quad (7)$$

где S_k/S_0 – доля общей площади зерна, «приходящаяся» на данную систему скольжения (S_k) по отношению к площади поверхности зерна S_0 , P – количество плоских участков, аппроксимирующих границы зерна, мера разориентации ξ_{ik} определяется по минимальному значению для данной СС данного зерна j , плоского участка границы k и всех систем скольжения l соседнего зерна: $\xi_{jk} = \min_l \{\xi_{jk}^l, l = 1, 2, \dots, 24\}$, подробное описание меры разориентации приведено ниже.

Для построения меры взаимной разориентации зерен рассмотрим две системы скольжения соседних зерен, определяемых своими векторами Бюргерса \mathbf{b}^i , \mathbf{b}^j и векторами нормалей к плоскостям скольжения \mathbf{n}^i , \mathbf{n}^j , указанные системы скольжения разделены плоским участком границы, который определен своей нормалью $\tilde{\mathbf{n}}$. Условием равенства нулю меры разориентации будем считать одновременное отсутствие скачка вектора Бюргерса и скачка вектора нормали к системе скольжения при переходе через границу. Далее, важным дополнительным условием является отличие от нуля проекции вектора Бюргерса ДОН на нормаль к границе. Таким образом, приходим к мере, выражающейся соотношением:

$$\xi_{jk} = \min_{l=1, \dots, 24} \{ \tilde{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{b}^l \mathbf{n}^l - \mathbf{b}^j \mathbf{n}^j) \cdot \tilde{\mathbf{n}} \}. \quad (8)$$

Введенная мера разориентации учитывает геометрические особенности взаимного расположения систем скольжения соседних зерен, а также части границы, пересекаемой плоскостями этих СС. Схожий подход можно найти в [15].

4. Описание поворотов решетки

Согласно предлагаемой модели поворот решетки (эволюция ортогонального тензора, связывающего КСК и ЛСК) представляется суммой двух составляющих:

- поворота решетки зерна в предположении его изолированности, который связывается с ортогональным тензором \mathbf{R}^e , сопровождающим упругую деформацию

$$\mathbf{F} = (\overset{o}{\nabla} \mathbf{r})^T = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p, \quad \mathbf{F}^e = \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{U}^e = \mathbf{V}^e \cdot \mathbf{R}^e, \quad (9)$$

\mathbf{F} , \mathbf{F}^e , \mathbf{F}^p – полный, упругий и пластический градиенты деформации, $\overset{o}{\nabla}$ – оператор Гамильтона в отчетной конфигурации, \mathbf{r} – радиус-вектор частицы в текущей конфигурации, \mathbf{U}^e , \mathbf{V}^e – симметричные правый и левый тензоры искажения;

- поворота только решетки зерна при сохранении конфигурации зерен в физическом пространстве, движущая сила этого поворота – несовместность движения дислокаций в соседних зернах.

При описании второй составляющей поворота требуется усложнить элементы статистической выборки – ими теперь являются не просто зерна, а зерна с приписанным набором нормалей к фасеткам границ, кроме того, появляется связность элементов выборки за счет назначения соседних зерен.

Для каждого зерна вводится еще одна внутренняя переменная – действующее на зерно моментное напряжение $\dot{\mathbf{m}}$. Предполагается аддитивность скоростей моментов:

$$\dot{\mathbf{m}} = \sum_{m=1}^M \dot{\mathbf{m}}^m, \quad (10)$$

где $\dot{\mathbf{m}}^m$ – составляющая скорости моментных напряжений в результате несовместности сдвига в данном зерне со сдвигами в соседнем m -м зерне, M – число соседних зерен. Эволюция вектора-момента \mathbf{m} (индекс опущен), ассоциированного с тензором $\dot{\mathbf{m}}^m$, определяется из анализа несовместности движения дислокаций на границе зерен следующим соотношением:

$$\dot{\mathbf{m}} = \mu \mathbf{N} \times [\mathbf{L}^{pT}] \cdot N, \quad (11)$$

где $\mu = \lambda G$ – параметр модели, характеризующий реакцию системы на несовместность сдвигов, G – модуль сдвига, λ – экспериментально определяемый (безразмерный) параметр, \mathbf{N} – внешняя для анализируемого зерна нормаль к границе с соседним зерном, $[\mathbf{L}^{pT}]$ – скачок пластической составляющей градиента скорости, определяемый согласно

$$[\mathbf{L}^{pT}] = \sum_i^K \dot{\gamma}^i \mathbf{n}^i \mathbf{b}^i - \sum_j^K \dot{\gamma}^{j(m)} \mathbf{n}^{j(m)} \mathbf{b}^{j(m)}, \quad (12)$$

где $\dot{\gamma}^i$, $\dot{\gamma}^{j(m)}$ – скорости сдвигов, \mathbf{b}^i , $\mathbf{b}^{j(m)}$ – единичные векторы вдоль векторов Бюргерса, \mathbf{n}^i , $\mathbf{n}^{j(m)}$ – нормали для систем скольжения в исследуемом и соседнем зернах соответственно, K – число систем скольжения.

В соотношении (12) явно учитывается несовместность сдвигов и ориентация границы. Векторную часть (11), (12), порождаемую операцией векторного умножения “ $\mathbf{N} \times$ ”, можно трактовать как вектор линии дислокации ориентационного несоответствия, залегающей в границе, то есть скорость момента, действующего на зерно, направлена вдоль этой линии. Скалярные произведения “ $\cdot \mathbf{N}$ ” характеризуют ориентацию сдвига по СС по отношению к границе. Например, в случае, когда направление сдвига по СС перпендикулярно нормали к границе, соответствующая составляющая будет нулевой, что согласуется с физическим анализом.

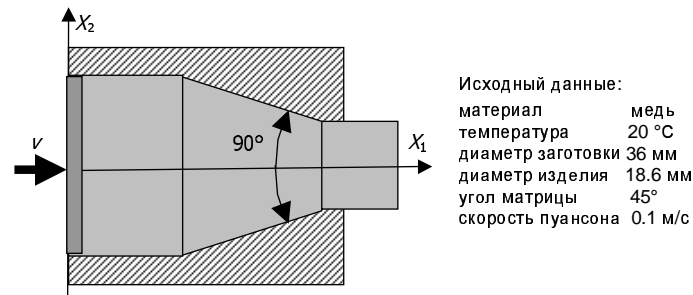


Рис. 2. Схема процесса прямого выдавливания

Спин $\mathbf{w}^{(p)}$, соответствующий рассматриваемой составляющей поворота решетки, определяется согласно соотношению:

$$\mathbf{w}^{(p)} = \begin{cases} \frac{1}{H} \mu & \text{при } \|\mu\| = \mu_c \text{ и } \mu : \dot{\mu} > 0, \\ 0 & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (13)$$

где $\mathbf{w}^{(p)}$ – спин решетки, $\|\mu\| = \sqrt{\mu : \mu}$ – интенсивность тензора моментных напряжений, $\Psi = \int_{\tau=0}^t \sqrt{\mathbf{w}^{(p)} : \mathbf{w}^{(p)}} d\tau$ – накопленный «пластический» решеточный поворот, $\mu_c = \mu_c(\Psi)$ – текущее критическое моментное напряжение, определяемое экспериментально.

Соотношения (11), (12) переключаются с приведенным в работе [15], но имеется ряд отличий, например, в (12) нет симметризации скорости деформации. Кроме того, в структуре соотношений (11)–(13) присутствует пороговость, что представляется физически обоснованным.

5. Применение модели для описания технологических процессов

Рассмотрим представленный выше подход на примере процесса прямого осесимметричного выдавливания меди из контейнера через коническую матрицу (рис. 2).

С математической точки зрения для определения параметров напряженно-деформированного состояния макроуровня имеем стационарную задачу упругопластичности. Особенности стационарной модели, общая математическая постановка задачи и алгоритм ее решения подробно обсуждаются в работе [8]. Отметим, что методика решения задачи макроуровня в данном случае строится с использованием эйлерово-лагранжева подхода. Суть его состоит в отслеживании истории деформирования каждой макроточки при ее движении по фиксированным в пространстве трубкам тока. Численная реализация в трехмерной постановке выполнялась с применением метода конечных элементов. Макроточки, перемещающиеся по трубкам тока, брались в форме треугольных призм, состоящих из трех конечных симплекс-элементов в форме тетраэдра. Все трубки тока в поперечном сечении области имеют форму треугольника. В силу осевой симметрии в качестве поперечного сечения области бралась четверть круга.

На рис. 3 показано изменение компонент тензора пластических макродеформаций и интенсивности макронапряжений по трем трубкам тока, расположенных вблизи оси, в средней части радиуса поперечного сечения и на поверхности рассматриваемой области. Следует отметить, что чем ближе трубка тока расположена к поверхности, тем сложнее нагружение, которое испытывает макроточка, двигающаяся по ней.

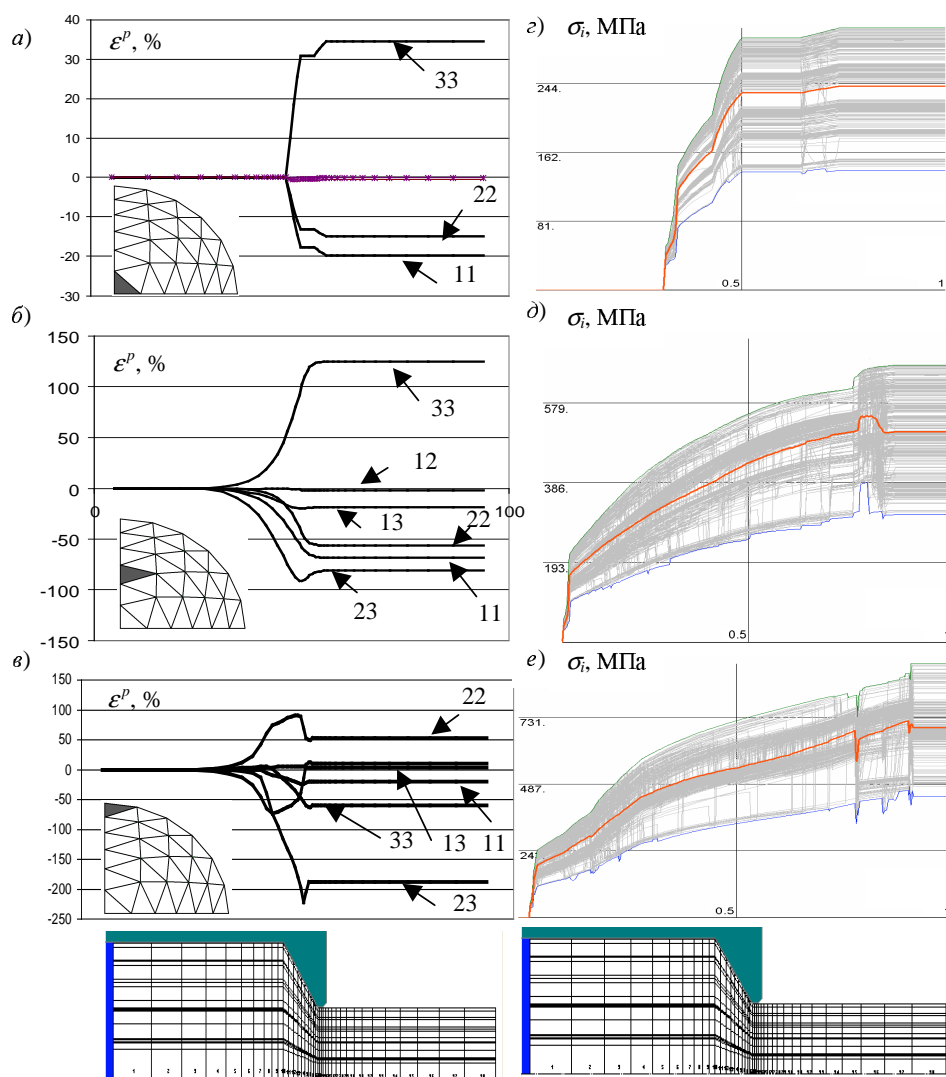


Рис. 3. Эволюция компонент тензора пластических макродеформаций (а–в) и интенсивности макронапряжений (з–е) по трем трубкам тока

На рис. 4 приведены прямые полюсные фигуры для трех кристаллографических направлений и трех трубок тока. Прямые полюсные фигуры приведены для сечения в средней части конусной матрицы и после выхода из калибрующего пояса инструмента.

Из рисунков можно видеть, что для трубки тока вблизи оси макроточка испытывает относительно простое нагружение, которое сопровождается ростом величины нормальных компонент тензора пластических макродеформаций. При этом сдвиговые компоненты данного тензора практически не увеличиваются. В результате формируется текстура, близкая к осевой. Для трубки тока в средней части сечения области можно наблюдать рост не только нормальных, но и сдвиговых компонент тензора ε^p . При этом компонента ε_{23}^p (рассматриваемая линия тока лежит вблизи координатной плоскости X_2X_3) испытывает не только рост, но и уменьшение своей величины при выходе из матрицы. Следствием этого является отход от осевой текстуры материала. Для трубки тока на поверхности области,

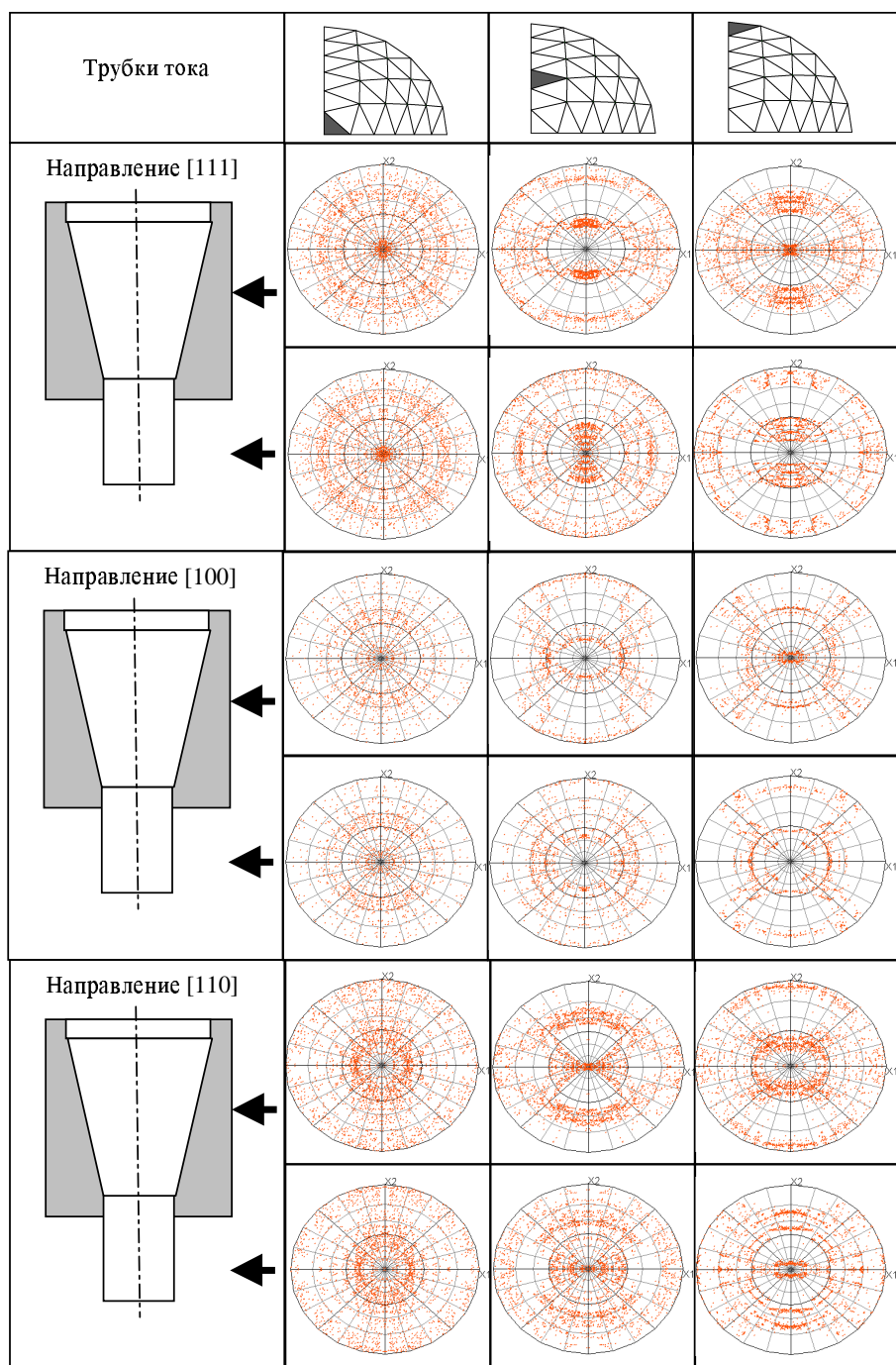


Рис. 4. Прямые полюсные фигуры для трех кристаллографических направлений и трех линий тока

испытывающей контактное взаимодействие с контейнером и матрицей, программа нагружения еще более сложная и сопровождается участками разгрузки и противоположного нагружения. При этом текстура не является осевой и испытывает значительные изменения по ходу движения макроточки.

Заключение

Для моделирования процессов глубокого пластического деформирования структурно неоднородных материалов предлагается двухуровневый подход, основным достоинством которого является возможность учета основных физических механизмов деформирования в достаточно простой и прозрачной форме.

Основное отличие модели представительного объема поликристалла, предлагаемой в работе, от существующих моделей текстурообразования – учет в явной форме разориентации соседних зерен и введение на основе рассмотрения возникающих (вследствие разориентации и несоответствия движения дислокаций по системам скольжения в соседних зернах) моментных напряжений, приводящих к формированию текстуры.

Результаты моделирования показывают принципиальную применимость предлагаемой модели мезоуровня для описания деформирования поликристаллов в реальных процессах обработки металлов (на примере экструзии): качественно описывается образование текстуры и эффекты упрочнения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 10-08-00156-а, 10-08-96010-р_Урал-а).

Summary

P.V. Trusov, V.N. Ashikhmin, P.S. Volegov, A.I. Shveikin. Mathematical Modelling of the Evolution of Polycrystalline Materials Structure under Elastoplastic Deformation.

A two-level (macro- and mesolevel) mathematical model for describing polycrystalline material's severe plastic deformation accompanied by the evolution of its structure is suggested. The model uses constitutive equations with internal variables. For the mesolevel model of polycrystalline aggregate, the authors take into account the intragranular dislocation slip with different hardening mechanisms, as well as the crystal lattice rotations in grains due to the incompatibility of dislocation motion in neighbouring grains. The results of solving the problem of copper cylindrical work extrusion are given and discussed.

Key words: anisotropy of properties, internal variables, constitutive equations, physical theories of plasticity, texture, hardening, two-level model.

Литература

1. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Волегов П.С., Швейкин А.И. Определяющие соотношения и их применение для описания эволюции микроструктуры // Физ. мезомеханика. – 2009. – Т. 12, № 3. – С. 61–71.
2. Макаров П.В. Моделирование процессов деформации и разрушения на мезоуровне // Изв. РАН. МТТ. – 1999. – № 5. – С. 109–130.
3. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Двухуровневая модель упругопластического деформирования поликристаллических материалов // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2009. – Т. 15, № 3. – С. 327–344.
4. Diard O., Leclercq S., Rousselier G., Cailletaud G. Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity. Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries // Int. J. Plast. – 2005. – V. 21. – P. 691–722.
5. Ашихмин В.Н., Трусов П.В. Прямое моделирование упругопластического поведения поликристаллов на мезоуровне // Физ. мезомеханика. – 2002. – Т. 5, № 3. – С. 37–51.

6. *Anand L.* Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains // *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* – 2004. – V. 193. – P. 5359–5383.
7. *Van Houtte P., Li S., Seefeldt M., Delannay L.* Deformation texture prediction: from the Taylor model to the advanced Lamel model // *Int. J. Plast.* – 2005. – V. 21. – P. 589–624.
8. *Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И.* Двухуровневая модель стационарных процессов упругопластического деформирования. Часть 1. Алгоритм // *Вычислительная механика сплошных сред*, – 2008. – Т. 1, № 3. – С. 15–24.
9. *Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И.* Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука, 1986. – 232 с.
10. *Линь Т.Г.* Физическая теория пластичности // *Проблемы теории пластичности. Сер. Новое в зарубежной механике*. – М.: Мир, 1976. – Вып. 7. – С. 7–68.
11. *Taylor G.I.* Plastic strain in metals // *J. Inst. Metals*. – 1938. – V. 62. – P. 307–324.
12. *Миркин Л.И.* Физические основы прочности и пластичности. – М: Изд-во Моск. ун-та, 1968. – 538 с.
13. *Хоникомб Р.* Пластическая деформация металлов. – М: Мир, 1972. – 408 с.
14. *Алехин В.П.* Физика прочности и пластичности поверхностных слоев материалов. – М.: Наука, 1983. – 280 с.
15. *Рыбин В.В.* Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М: Металлургия, 1986. – 224 с.
16. *Horstemeyer M.F., Potirniche G.P., Marin E.B.* // *Handbook of Materials Modeling*. – Springer, 2005. – P. 1133–1149.

Поступила в редакцию
18.05.10

Трусов Петр Валентинович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой математического моделирования систем и процессов Пермского государственного технического университета.

E-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru

Ашихмин Валерий Николаевич – кандидат технических наук, доцент кафедры математического моделирования систем и процессов Пермского государственного технического университета.

E-mail: awn@perm.ru

Волегов Павел Сергеевич – аспирант кафедры математического моделирования систем и процессов Пермского государственного технического университета.

E-mail: crocinc@mail.ru

Швейкин Алексей Игоревич – кандидат физико-математических наук старший преподаватель кафедры математического моделирования систем и процессов Пермского государственного технического университета.

E-mail: sai@matmod.pstu.ac.ru